

УДК 538.971

**ВЛИЯНИЕ ЗЕРНОГРАНИЧНОЙ СЕГРЕГАЦИИ ДОПАНТА НА
ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ОПТИЧЕСКИХ ПЛЁНОК СЕРЕБРА**
Марчий Г.В. (ФТИ им. А.Ф. Иоффе), **Терещенко И.Б.** (ФТИ им. А.Ф. Иоффе), **Губаль А.Р.**
(Институт химии СПбГУ), **Комаревцев И.М.** (ФТИ им. А.Ф. Иоффе)
Научный руководитель – кандидат технических наук Самсонов Д.С.
(ФТИ им. А.Ф. Иоффе)

В работе путём численного атомистического моделирования исследуется влияние допанта, склонного к сегрегации в границах зёрен, на термическую стабильность и коррозионную стойкость оптических покрытий на основе поликристаллического серебра. Для моделирования используются методы молекулярной динамики, Монте-Карло и теория функционала электронной плотности в базисе плоских волн.

Введение. Благодаря высокой отражательной способности в широкой полосе спектра, тонкопленочные отражающие покрытия на основе серебра широко применяются в приборостроении. Многие сферы применения требуют от зеркал устойчивости к коррозии и температурным нагрузкам.

Для защиты отражающего слоя серебра от атмосферной коррозии используются различные конструкции покрытия, часто предполагающие один или несколько диэлектрических барьерных слоёв в сочетании с адгезионным слоем, улучшающим адгезию диэлектрика к серебру [Wolfe и др.]. Такие защитные покрытия значительно увеличивают коррозионную стойкость, однако не обеспечивают абсолютную защиту.

Эксперименты [Wolfe и др.] показывают, что несмотря на толщину менее 1 нм, наличие и состав адгезионного слоя играют значительную роль в устойчивости к коррозии. Folgner и др. [<https://doi.org/10.1364/AO.56.000C75>] показали, что наличие в адгезионном слое никеля кардинально меняет характер коррозии, приводя к лучшей коррозионной стойкости.

Несмотря на феноменологическое описание, природа данной коррозии и механизмы влияния на неё адгезионного слоя остаются малоизученными.

Одной из областей применения защищённых серебряных покрытий являются системы оптической диагностики плазмы в больших токамаках, в частности в проекте ITER. В предыдущей работе [Самсонов и др. 2022 Nucl. Fusion <https://doi.org/10.1088/1741-4326/ac544d>] мы исследовали деградацию подобных конструкций зеркал в условиях, моделирующих выброс пара в реакторе ITER. Наблюдались сходная с атмосферной коррозия, рост зёрен в поликристаллическом серебре и, как следствие, уменьшение коэффициента отражения.

Для улучшения термической стабильности и коррозионной стойкости поликристаллических материалов активно используются подход инженерии границ зёрен [Bettayeb и др. <https://doi.org/10.1149/2.1341811jes>, Chookajorn и др. <https://doi.org/10.1126/science.1224737>]: контроль распределения ориентаций зёрен или модификация свойств межзёренной границы с помощью примеси. Модификация свойств границ зёрен приводит к существенному изменению свойств всего поликристалла, особенно в случае малого размера зёрен, характерного для тонкопленочных покрытий.

Основная часть. Добавление в слой серебра допанта, склонного к сегрегации в границах зёрен, может существенно изменить подвижность межзёренной границы и стабильность самих зёрен в необходимом диапазоне температур. Также сегрегация примеси приводит к изменению химического потенциала межзёренной границы, то есть изменяет коррозионную стойкость. Таким образом, исследовав влияние различных примесей на стабильность зёрен и химический потенциал, можно узнать, существует ли допант, решающий обе задачи.

Для первоначального исследования был выбран никель, так как известно, что он склонен к сегрегации в межзёренной границе и интерфейсах серебряного слоя, а его присутствие на верхнем интерфейсе серебряного слоя улучшает коррозионную стойкость.

Для исследования эффекта проводится численное моделирование методами молекулярной динамики, Монте-Карло и теории функционала плотности в базисе плоских волн.

Выводы. С помощью методов молекулярной динамики и Монте-Карло получены атомистические конфигурации, включающие пересечение поверхности серебра и границ зёрен, при наличии примеси никеля. Для данных конфигураций методом теории функционала электронной плотности определяется изменение химического потенциала поверхности вблизи границы зёрен под влиянием примеси. Путём поиска минимума свободной энергии системы определяется равновесный размер зёрен серебра при наличии примеси никеля.

Разработанная методика легко переносится на случай любой другой примеси, способной сегрегироваться в границах зёрен серебра. Ведётся работа по экспериментальному подтверждению результатов.

Марчий Г.В. (автор)

Подпись

Самсонов Д.С. (научный руководитель)

Подпись